



Joseph B. Lambert  
Scott Gronert  
Herbert F. Shurvell  
David A. Lightner

# Spektroskopie

Strukturaufklärung in der Organischen Chemie

2., aktualisierte Auflage

*Bafög-  
Ausgabe*

€49,<sup>95</sup><sub>[D]</sub> €51,<sup>40</sup><sub>[A]</sub>  
sFr 58,<sup>40</sup>

# Spektroskopie

2., aktualisierte Auflage

# Spektroskopie - Bafög-Ausgabe

## Inhaltsverzeichnis

Spektroskopie

Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Vorwort zur deutschen Ausgabe

### 1 Einführung in die spektroskopische Strukturaufklärung

1.1 Der spektroskopische Zugang zur Molekülstruktur

1.2 Das elektromagnetische Spektrum

1.3 Molekülmasse und Summenformel

1.4 Strukturisomere und Stereoisomere

1.5 Beiträge der verschiedenen spektroskopischen Methoden

1.5.1 Kernspinresonanzspektroskopie

1.5.2 Massenspektrometrie

1.5.3 Schwingungsspektroskopie

1.5.4 Elektronenabsorptionsspektroskopie

### 2 Einführung in die NMR-Spektroskopie

2.1 Magnetische Eigenschaften von Atomkernen

2.2 Häufig untersuchte Nuklide

2.3 Die chemische Verschiebung

2.4 Anregung und Relaxation

2.5 Puls-Verfahren

2.6 Die Kopplungskonstante

2.7 Quantifizierung und komplexe Aufspaltung

2.8 Dynamische Effekte

2.9 Festkörper-NMR-Spektroskopie

# Inhaltsverzeichnis

## 2.10 Experimentelle Methoden

2.10.1 Das Spektrometer und die Probe

2.10.2 Optimierung des Signals

2.10.3 Spektrale Parameter

Literaturhinweise

## 3 Die chemische Verschiebung

3.1 Faktoren, die  $^1\text{H}$ -chemische Verschiebungen beeinflussen

3.2  $^1\text{H}$ -chemische Verschiebungen und Struktur

3.2.1 Gesättigte Kohlenwasserstoffe und deren Derivate

3.2.2 Ungesättigte Kohlenwasserstoffe und deren Derivate

3.2.3 Aromaten

3.2.4 Protonen an Sauerstoff- und Stickstoffatomen

3.2.5 Programme für empirische Berechnungen

3.3 Lösungsmittel- und Isotopeneffekte

3.4 Faktoren, die  $^{13}\text{C}$ -chemische Verschiebungen beeinflussen

3.5  $^{13}\text{C}$ -chemische Verschiebungen und Struktur

3.5.1 Gesättigte Kohlenwasserstoffe und deren Derivate

3.5.2 Ungesättigte Verbindungen

3.5.3 Carbonylgruppen

3.5.4 Programme für empirische Berechnungen

3.6 Tabellen mit chemischen Verschiebungen

Literaturhinweise

## 4 Die Kopplungskonstante

4.1 NMR-Spektren erster Ordnung

4.2 Chemische und magnetische Äquivalenz

4.3 Kopplungsmechanismen und Vorzeichen

4.4 Kopplungen über eine Bindung

4.5 Geminale Kopplungen

4.6 Vicinale Kopplungen

# Inhaltsverzeichnis

- 4.7 Weitreichende Kopplungen
- 4.8 Spektrenanalyse
- 4.9 Spektren zweiter Ordnung
- 4.10 Tabellen mit Kopplungskonstanten
- Literaturhinweise

## 5 Weiterführende Themen der eindimensionalen NMR-Spektroskopie

- 5.1 Spin-Gitter- und Spin-Spin-Relaxation
- 5.2 Reaktionen auf der NMR-Zeitskala
- 5.3 Mehrfachresonanz-Experimente
- 5.4 Kern-Overhauser-Effekt
- 5.5 Spektrale Editierung
- 5.6 Erhöhung der NMR-Empfindlichkeit
- 5.7 Kohlenstoffkonnektivitäten und die eindimensionale INADEQUATE-Pulsfolge
- 5.8 Phasenzyklisierung, zusammengesetzte Pulse und geformte Pulse
- Literaturhinweise

## 6 Zweidimensionale NMR-Spektroskopie

- 6.1 Proton-Proton-Korrelation durch J-Kopplung
- 6.2 Proton-Heterokern-Korrelation durch J-Kopplung
- 6.3 Proton-Proton-Korrelation durch den Raum oder durch chemischen Austausch
- 6.4 Kohlenstoff-Kohlenstoff-Korrelation
- 6.5 Höherdimensionale NMR-Spektroskopie
- 6.6 Gepulste Feldgradienten
- 6.7 Diffusionsaufgelöste NMR-Spektroskopie DOSY
- Literaturhinweise

## 7 Instrumentelle und physikalisch-chemische Grundlagen der

# Inhaltsverzeichnis

## Massenspektrometrie

### 7.1 Einleitung

### 7.2 Ionisierung

7.2.1 Elektronenionisierung EI

7.2.2 Chemische Ionisierung CI

7.2.3 Desorptionsmethoden: FAB und MALDI

7.2.4 Elektrospray-Ionisierung ESI

7.2.5 Chemische Ionisierung unter Atmosphärendruck APCI

7.2.6 Kombinierte (Hybrid-)Ionisierungsmethoden

### 7.3 Massenanalyse

7.3.1 Flugzeit-Massenanalysatoren (TOF-Analysatoren)

7.3.2 Ionen-Cyclotron-Resonanz-Zellen und FT-ICR-Massenspektrometrie

7.3.3 Quadrupol-Ionenfallen (QITs)

7.3.4 Quadrupol-Massenfilter

7.3.5 Sektorfeld-Massenanalysatoren

7.3.6 Orbitrap-Massenanalysator

7.3.7 Hybridinstrumente

7.3.8 Massenanalysatoren - Zusammenfassung

### 7.4 Probenvorbereitung

7.4.1 Gaschromatographie/Massenspektrometrie (GC/MS)

7.4.2 Flüssigkeitschromatographie/Massenspektrometrie (LC/MS)

7.4.3 Daten aus GC/MS- und LC/MS-Analysen

7.4.4 Gelelektrophoretische Trennungen

### Literaturhinweise

## 8 Anregung und Fragmentierung von Ionen in der Gasphase

### 8.1 Einleitung

### 8.2 Energetische und kinetische Aspekte von Ionisierung und Fragmentierung

### 8.3 Fragmentierungsreaktionen und funktionelle Gruppen

### 8.4 Kohlenwasserstoffe

# Inhaltsverzeichnis

8.5 Amine

8.6 Alkohole, Ether und Phenole

8.7 Alkyl- und Arylhalogenide

8.8 Ketone und Aldehyde

8.9 Carbonsäuren und deren Derivate

8.10 Verbindungen mit anderen funktionellen Gruppen

8.11 Fragmentierungstechniken und Tandem-Massenspektrometrie

Literaturhinweise

## 9 Interpretation von Massenspektren

9.1 Einleitung

9.2 Ermittlung von Molekülmasse und Summenformel

9.2.1 Molekül-Ionen

9.2.2 Exakte Masse und Massendefekte

9.2.3 Isotopenmuster

9.2.4 Mehrfach geladene Ionen

9.3 Ableitung von Strukturen aus Massenspektren

9.3.1 Strukturanalyse 1

9.3.2 Strukturanalyse 2

9.3.3 Strukturanalyse 3

9.3.4 Strukturanalyse 4

9.4 Biopolymere

9.4.1 Peptide und Proteine

9.4.2 Andere Biopolymere

Literaturhinweise

## 10 Quantitative Anwendungen der Massenspektrometrie

10.1 Einleitung

10.2 Einflüsse auf die Signalintensitäten in Massenspektren

10.2.1 Effizienz der Ionisierung

10.2.2 Effizienz der Detektion

# Inhaltsverzeichnis

10.3 Interne Standards und relative Intensitäten

10.4 Thermodynamische Daten aus massenspektrometrischen Messungen

10.4.1 Chemie von Ionen in der Gasphase

10.4.2 Aciditäten und Basizitäten in der Gasphase

10.4.3 Bindungsdissoziationsenergien

10.4.4 Relative Assoziationskonstanten in kondensierter Phase

Literaturhinweise

11 Einführung in die Infrarot- und Raman-Spektroskopie

11.1 Einleitung

11.2 Molekülschwingungen

11.3 Infrarot- und Raman-Spektren

11.4 Einheiten und Bezeichnungen

11.5 Infrarot-Spektroskopie: Dispersions- und FT-IR-Spektrometer

11.5.1 Dispersions-IR-Spektrometer

11.5.2 Fourier-Transformations-IR-Spektrometer

11.6 Aufnahmeverfahren in der Infrarot-Transmissionsspektroskopie

11.6.1 Trägermaterialien

11.6.2 Flüssigkeiten und Lösungen

11.6.3 Feststoffe

11.7 Raman-Spektroskopie

11.8 Raman-Aufnahmeverfahren

11.8.1 Flüssigkeiten und Lösungen

11.8.2 Feststoffe

11.9 Depolarisationsmessungen

11.10 Infrarot-Reflexionsspektroskopie

Literaturhinweise

12 Infrarot- und Raman-Gruppenfrequenzen

12.1 Einleitung

12.2 Faktoren, die Gruppenfrequenzen beeinflussen



# Inhaltsverzeichnis

- 12.3 Infrarot-Gruppenfrequenzen
- 12.4 Raman-Gruppenfrequenzen
- 12.5 Vorbereitende Analyse
- 12.6 Der Bereich der CH-Streckschwingungen (3340 bis 2700 cm<sup>-1</sup>)
- 12.7 Der Bereich der C=O-Streckschwingungen (1850 bis 1650 cm<sup>-1</sup>)
- 12.8 Aromatische Verbindungen
- 12.9 Verbindungen mit Methylgruppen
- 12.10 Verbindungen mit Methylengruppen
- 12.11 Ungesättigte Verbindungen
- 12.12 Sauerstoffhaltige Verbindungen
- 12.13 Stickstoffhaltige Verbindungen
- 12.14 Phosphor- und schwefelhaltige Verbindungen
- 12.15 Heterocyclische Verbindungen
- 12.16 Halogenhaltige Verbindungen
- 12.17 Bor-, Silicium-, Zinn-, Blei- und Quecksilber-Verbindungen
- 12.18 Isotopenmarkierte Verbindungen
- 12.19 Nutzung der Literatur zur Analyse von Schwingungsspektren

Literaturhinweise

## 13 Einführung und experimentelle Aspekte der UV/Vis-Spektroskopie

- 13.1 Einleitung
- 13.2 Messung der Absorption im UV/Vis-Bereich
  - 13.2.1 Wellenlänge und max
  - 13.2.2 Das Lambert-Beer-Gesetz und max
  - 13.2.3 Das Franck-Condon-Prinzip und die Form von Absorptionskurven
  - 13.2.4 Lösungsmittelleffekte und Verschiebungen von max
- 13.3 Quantitative UV/Vis-Messungen
  - 13.3.1 Differenzspektroskopie
  - 13.3.2 Abweichungen vom Lambert-Beer-Gesetz

# Inhaltsverzeichnis

13.3.3 Isosbestische Punkte

## 13.4 Elektronische Übergänge

13.4.1 Singulett- und Triplettzustände

13.4.2 Klassifizierung elektronischer Übergänge

13.4.3 Erlaubte und verbotene Übergänge

## 13.5 Experimentelle Aspekte

13.5.1 Lösungsmittel

13.5.2 Messküvetten und Probenvorbereitung

13.5.3 Mögliche Fehlerquellen

Literaturhinweise

## 14 Strukturanalyse mithilfe von UV/Vis-Spektren

### 14.1 Isolierte Chromophore

14.1.1 Die Carbonylgruppe: Absorptionen von Ketonen und Aldehyden

14.1.2 Die Carbonylgruppe: Absorptionen von Carbonsäuren, Estern und Amiden

14.1.3 Unkonjugierte Alkene

### 14.2 Konjugierte Chromophore

14.2.1 Diene und Polyene

14.2.2 ,-ungesättigte Carbonylverbindungen

### 14.3 Aromatische Verbindungen

### 14.4 Beispiele für natürlich vorkommende Chromophore

14.4.1 Aminosäuren, Peptide und Proteine

14.4.2 Nucleinsäuren und Polynucleotide

14.4.3 Porphyrine und Metalloporphyrine

### 14.5 Sterische Effekte

### 14.6 Lösungsmittelleffekte und dynamische Gleichgewichte Beispiele

### 14.7 Untersuchung von Wasserstoffbrückenbindungen

### 14.8 Homokonjugation

### 14.9 Charge-Transfer-Banden

### 14.10 Die Woodward-Fieser-Regeln

# Inhaltsverzeichnis

Literaturhinweise

## Ü Übungsaufgaben

Übungsaufgaben Kapitel 1

Übungsaufgaben Kapitel 2

Übungsaufgaben Kapitel 3

Übungsaufgaben Kapitel 4

Übungsaufgaben Kapitel 5

Übungsaufgaben Kapitel 6

Übungsaufgaben mit Lösungen Kapitel 7

Übungsaufgaben Kapitel 7

Übungsaufgabe mit Lösung Kapitel 8

Übungsaufgaben Kapitel 8

Übungsaufgaben Kapitel 9

Übungsaufgaben Kapitel 10

Übungsaufgaben Kapitel 11

Übungsaufgaben Kapitel 12

Übungsaufgaben Kapitel 13

Übungsaufgaben mit Lösungen Kapitel 14

Übungsaufgaben Kapitel 14

Register

Ins Internet: Weitere Infos zum Buch, Downloads, etc.

Copyright

# Copyright

Daten, Texte, Design und Grafiken dieses eBooks, sowie die eventuell angebotenen eBook-Zusatzdaten sind urheberrechtlich geschützt. Dieses eBook stellen wir lediglich als **persönliche Einzelplatz-Lizenz** zur Verfügung!

Jede andere Verwendung dieses eBooks oder zugehöriger Materialien und Informationen, einschließlich

- der Reproduktion,
- der Weitergabe,
- des Weitervertriebs,
- der Platzierung im Internet, in Intranets, in Extranets,
- der Veränderung,
- des Weiterverkaufs und
- der Veröffentlichung

bedarf der **schriftlichen Genehmigung** des Verlags. Insbesondere ist die Entfernung oder Änderung des vom Verlag vergebenen Passwortschutzes ausdrücklich untersagt!

Bei Fragen zu diesem Thema wenden Sie sich bitte an: [info@pearson.de](mailto:info@pearson.de)

## Zusatzdaten

Möglicherweise liegt dem gedruckten Buch eine CD-ROM mit Zusatzdaten bei. Die Zurverfügungstellung dieser Daten auf unseren Websites ist eine freiwillige Leistung des Verlags. **Der Rechtsweg ist ausgeschlossen.**

## Hinweis

Dieses und viele weitere eBooks können Sie rund um die Uhr und legal auf unserer Website herunterladen:

**<http://ebooks.pearson.de>**